

構造生物学ビームライン PF-AR NW-12

○松垣直宏、五十嵐教之、鈴木守、佐藤昌史、河田洋、塩屋達郎、土屋公央、山本樹、
若槻壮市

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

2002年3月PF-AR北西棟の竣工の後建設を進めてきた構造生物学ビームラインNW-12は、2003年2月のビームタイム終了時にたんぱく質結晶を用いた回折データ測定が可能となった。5月のビームタイムから共同利用に開放する予定である。本ビームラインは、構造生物学のハイスループット化の要望を満たすため、以下のような特徴を持つよう設計されている。

1. 高速なデータ測定

12keV 付近に強度を最適化したアンジュレータ光源からの高いビーム強度、210mm x 210mm の二次元回折像を 1 秒で読み出し可能なCCD検出器により、データ収集時間が既存のPFの構造生物学ビームラインに比べて数倍ないし10数倍短縮された。

2. 微小結晶を用いたデータ測定

サンプル軸の回転偏差2.2ミクロンの高精度ゴニオメータを備えている。

3. 多波長異常分散法を用いた効率的なデータ測定

平行化X線ミラーおよび液体窒素による分光結晶の冷却により、高いエネルギー分解能を実現している。また、7keV - 17keV で定位置出射可能な分光器を備え、波長変更の際のアライメントによる時間のロスが少ない。

2月の分光器の定位置出射調整および、当研究所の構造生物学グループによっておこなわれたデータ収集の結果を以下に示す。この実験により、ある糖転移酵素の構造解析が成功した。

Crystal	Protein A	Protein B	Protein C
Size (mm ³)	0.05 x 0.05 x 0.2	0.1 x 0.1 x 0.03	0.4 x 0.4 x 0.2
Wavelength (Å)	0.978	0.978	0.978
Temperature (K)	100	100	100
Oscillation angle (°)	1.0	1.0	1.0
Number of Images	180	180	180
Exposure Time per Image (sec)	5	5	5
Total data collection time (min)	20	20	20
Space group	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁	<i>P</i> 3 ₁ 21	<i>R</i> 3
Cell dimensions (Å)	61.2 85.8 122.3	63.3 63.3 82.1	146.0 146.0 64.3
Resolution (Å)	40 - 2.0 (2.11 - 2.0)	40 - 3.0 (3.19 - 3.0)	40 - 1.7 (1.79 - 1.70)
Completeness (%)	98.9 (99.7)	100 (100)	99.2 (99.2)
Rmerge (%)	7.8 (25.4)	7.3 (25.1)	6.9 (38.8)
<i>I</i> / <i>s</i> (<i>I</i>)	6.7 (2.8)	7.9 (3.0)	5.6 (1.9)